

Csesztregi Tamás – Rompos Éva

Nemzeti Szakértői és Kutató Központ Kábítószervizsgáló Szakértői Intézet | csesztregi.tamas@nszkk.govhu

A dizájner drogok bűnügyi célú analitikai vizsgálata

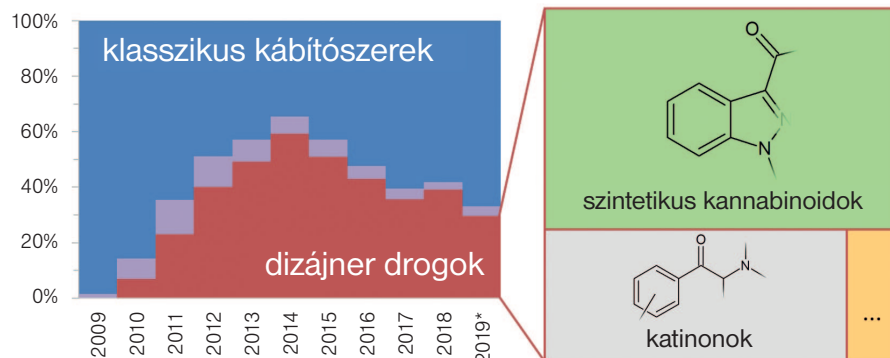
A tudatmódosító szerek hazai piacán 2008–2009 folyamán több új szer is megjelent, azonban ezek mindössze néhány esetet tettek ki az évi mintegy kétezer kábítószer-lefoglalásból. A dizájner drogok hazai „forradalma” a mefedron (4-metil-metkatinon) megjelenésével kezdődött el 2010 nyarán. Az új, akkor még legális szer néhány hónap alatt a leggyakrabban használt illegális stimulánshoz, az amfetaminhoz hasonló népszerűséget ért el. A mefedron a kábítószerlistára kerülést követően szinte azonnal eltűnt az utcáról, és helyét újabb és újabb vegyületek vették át. A korábban nem látott dinamikájú változások, a szinte hétről hétre megjelenő új vegyületek és a jogi szabályozás módosulása komoly feladat elé állította a fekete-piaci minták bűnügyi célú vizsgálatával foglalkozó laboratóriumokat. [1]

Cikkünk a dizájner drogok analitikai vizsgálati módszereit, valamint a hazai fekete-piac és a hozzá kapcsolódó jogszabályok változásának a bűnügyi laboratóriumok munkájára gyakorolt hatását mutatja be.

A hazai dizájnerpiac alakulása

Az Európai Unió korai jelzőrendszerébe bejelentett közel 800 új vegyület közül mintegy 300 anyag a magyar piacon is megjelent az elmúlt évtizedben. Több esetben a magyar laboratórium detektálta egy-egy új anyag megjelenését elsőként Európában. Hazánkban az alapvető problémát nemcsak a vegyületek nagy száma, hanem az európai átlaghoz képest kiugróan magas piaci részarányuk jelentette: a dizájner drogok a rendőrségi lefoglalások közel 60%-át tették ki 2014-ben. Az elmúlt 10 évben lefoglalt anyagok közel kétharmada a szintetikus kannabinoidok csoportjába tartozó vegyületet tartalmazott, míg a fennmaradó részt döntő többségében a katinonszármazékok tették ki (**1. ábra**).

A laboratóriumi vizsgálati eredmények statisztikai feldolgozása egyértelműen mu-



1. ábra. A klasszikus és dizájner drogok aránya és a főbb dizájnerdrog-vegyületek megoszlása a rendőrségi lefoglalásokban a Nemzeti Szakértői és Kutató Központban vizsgált anyagok eredményei alapján (2019* – részlegesen feldolgozott adatok)

latja, hogy a piacon egy-egy időszakban jellemzően néhány vegyület dominál, majd a jogi vagy kínálati viszonyok változása esetén néhány hónapon belül eltűnik a „rég” vegyület, és helyét új komponens veszi át.

Dizájner drog – dizájner jog

A jog első válasza az új anyagok terjedésére az egyes vegyületek kábítószerlistára vétele volt. Mivel a kábítószerlistát a magyar jogban törvény formájában építették be, módosítása a parlament törvényhozási rendje szerint lehetséges. A jogalkotási folyamat általános átfutási ideje jelentősen hosszabb, mint a piaci kínálat akár egy-két hónap alatt lezajló kicserélődése. Az újabb vegyületek megjelenési ütemének gyorsulása és az egymáshoz hasonló vegyületek széles köre miatt új jogi eszközre volt szükség, hogy korlátozni lehessen a nem ismert egészségügyi és szociális kockázatokat jelentő dizájner drogok szabad terjedését.

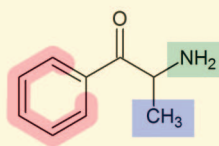
Szakmai konszenzus alapján az új pszichoaktív anyagok ellenőrzésére megalkotott jogszabály egyszerre alkalmazza az egyedi listás és az ún. generikus (kémiai szerkezeten alapuló csoportosítási) megközelítést azzal a céllal, hogy megelőzze, visszaszorítsa a még „forgalomba” nem került,

azonban szerkezetében és ezáltal várhatóan hatásában is hasonló vegyületek hazai megjelenését és terjedését. A szabályozás generikus leírásainak első verziója az addig az európai piacon megjelent és a tudományos szakirodalomban hatásos vegyületeként publikált szintetikus kannabinoidok, katinonok, fenetilaminok és triptaminok szerkezeteit fedte le. A későbbi módosítások során a vegyületcsaládok köre kibővült a fentanilszármazékokkal is. A kémiai leírások kialakításakor külön figyelmet fordítottak arra, hogy a legális gyógyászati felhasználással rendelkező vegyületeket ez a szabályozás ne érintse. (Megjegyzendő, hogy a generikus leírásnak megfelelő szerkezetű, de a kábítószerlistán szereplő vegyületek sem minősülnek jogi értelemben új pszichoaktív anyagnak.)

A generikus szabályozás elvét az egyik legegyszerűbb, de az igazságügyi szakértői gyakorlatban gyakran előforduló vegyületcsalád, a katinonok példáján mutatjuk be (**2. ábra**). Amennyiben egy vegyület tartalmazza az adott alapvegyületnek megfelelő szerkezeti részt és szubsztituen-sei teljeskörűen megfelelnek az egyes pozíciókhoz leírt meghatározásoknak, úgy a vegyület jogi értelemben „új pszichoaktív anyagnak” minősül. A generikus szerke-



Azok a kationon (2-amino-1-fenilpropán-1-on) szerkezeti részt tartalmazó vegyületek, a bupropion kivételével, amelyekben



a propán-1-on szerkezeti egység 3-as helyzetű szénatomja legfeljebb 6 szénatomos alkilcsoportot tartalmaz

a fenilcsoport egy vagy – tetszőleges kombinációban több halogénatomot, metil-, etil-, metoxi-, metiléndioxi- (metilénbiszoxi-), trimetilén- (propán-1,3-diil-), etilénoxi-csoportot tartalmazhat,

a nitrogénatom

- 1–4 szénatomos alkilcsoportot vagy alkilcsoportokat tartalmazhat, vagy
- benzilcsoportot tartalmazhat, vagy
- pirrolidin- vagy piperidingyűrű tagja.

2. ábra. A kémiai szerkezetleírás a kationonok szabályozásában (55/2014. EMMI rendelet, I. melléklet 2. pontja, a 2020. februárban hatályos változat alapján)

zetleírásokkal meghatározott csoportoktól eltérő szerkezetű vegyületeket a jogszabály tételesen, kémiai név szerint sorolja fel. A kábítószerre vonatkozó ENSZ-egyezményhez hasonlóan a hazai új pszichoaktív szabályozás sem tesz különbséget jogilag a királis vegyületek sztereoizomereit között. A szabályozásból adódóan a büntügyi célú vizsgálatok során *nem szükséges a vizsgált királis vegyületek konfigurációjának meghatározása.*

Az új pszichoaktív anyagok jogi szabályozása a büntetést a tiszta hatóanyag mennyiségéhez köti. A mennyiség határa – a 2020 februárjában érvényes szabályozás szerint – minden új pszichoaktív anyagra egységesen 2 gramm. A jogszabályból adódóan az igazságügyi szakértői vizsgálatok során *szükség van a dizájner drogok hatóanyag-tartalmának kvantitatív meghatározását lehetővé tevő analitikai módszerek alkalmazására is.*

Dizájner drogból kábítószer

Az új pszichoaktív anyagok büntetőjogi szabályozásának egyik fő célja az új vegyületek korlátlan piacra kerülésének megakadályozása. Egy-egy korábban nem ismert, újonnan piacra kerülő vegyület esetében általában nem áll rendelkezésre olyan információ (például a központi idegrendszerre gyakorolt hatás és a függőség kialakulásának tudományosan megalapozott bizonyítéka), ami indokolná a kábítószerhez hasonló mértékű, bizonyos esetekben akár életfogytig tartó büntetés kiszabását. A jogszabály lehetőséget teremt azonban arra, hogy egy dizájner drog a kábítószerlistára kerüljön, amennyiben kiderül róla, hogy a kábítószerhez hasonló veszélyt jelent.

Mivel a kábítószerlista a kémiai elnevezés alapján felsorolt vegyületeket tartalmaz, így előfordulhat, hogy egy vegyület kábítószer-

nek minősül, míg annak izomereit az új pszichoaktív anyag jogi kategóriájába esnek. A két kategória különböző büntetőjogi megítélése miatt az igazságügyi szakértői vizsgálatok során *komoly jelentősége van az egyes izomerek egyértelmű beazonosításának.*

A büntügyi célú analitikai vizsgálatok feladata, kihívásai

A rendőrség által lefoglalt kábítószeranyagok igazságügyi szakértői vizsgálata a Nemzeti Szakértői és Kutató Központ (korábban a Büntügyi Szakértői és Kutató Intézet) kábítószervizsgáló laboratóriumi hálózatának feladata. A „listás” komponensek kimutatása alapozza meg a vizsgálata bizonyítását, míg a tiszta hatóanyag mennyisége a büntetési kategória megállapításában játszik jelentős szerepet.

A rutinvizsgálatok alapja mind a kvalitatív, mind a kvantitatív módszerek esetében a referenciaanyag válaszjelével történő összehasonlítás. A piacon újonnan megjelenő dizájner drogok vizsgálata esetében a kereskedelmi forgalomban kapható megfelelő referenciaanyagok hiánya jelenti az egyik legnagyobb szakmai kihívást.

A másik jelentős kihívás a kábítószeres ismert körére optimalizált vizsgálati stratégia új feladatoknak megfelelő átalakítása volt. Az egyes feladatokban az alkalmazható vagy alkalmazandó analitikai vizsgálati módszereket alapvetően a *célvegyületek köre*, illetve az azt tartalmazó *vizsgálati anyag jellege (a mátrix)* határozza meg.

Célvegyületek

A dizájner drogok esetében – a feketepiac dinamikájából és a jogi szabályozásból adódóan – a célvegyületek köre dinamikusan változik. Általánosságban elmondható, hogy a dizájner drogok, a „klasszikus” szinteti-

kus kábítószerhez hasonlóan, jellemzően 100–450 relatív molekulatömegű, egy vagy több aromás csoportot, nitrogént, illetve oxigént tartalmazó, *kismolekulás szerves vegyületek*. Ezen belül a feketepiacon megjelenő vegyületek molekulaszervezetük alapján változatos alapvázakkal rendelkező vegyületcsoportokba sorolhatók. [2,3] Ez a változatosság olyan áttekinthető jellegű vizsgálati módszereket követel meg, amelyekkel e vegyületek széles köre nagy megbízhatósággal azonosítható. A jogszabályi kritériumokból adódóan a vizsgálati módszereknek meg kell tudniuk különböztetni az izomereket, homológokat, illetve *detektálniuk kell a korábban nem ismert, de potenciálisan ebbe a körbe tartozó új vegyületeket is.*

Mátrix

A napi gyakorlatban a büntügyi minták jellegük szerint leggyakrabban növényi anyagok (3. ábra), porok, tabletták vagy tárgy felületén található anyagmaradványok. Ezekben a vizsgálati tárgyakban lehetnek hagyományos kábítószeres, dizájner drogok, de az sem kizárt, hogy bármilyen egyéb, a hétköznapi életben gyakran előforduló vagy egyáltalán nem hétköznapi anyag érkezik vizsgálatra (például cukor, szódabikarbóna, mosópor, medencefertőtlenítő, testépítő szer, kálium-cianid vagy TNT). A dizájner drogok esetében a hatóanyagok előfordulhatnak önmagukban akár tiszta formában is (jellemzően a „kristály” utcai néven ismert, por formájában forgalomban lévő kationoszármazékok, esetenként szintetikus kannabinoid hatóanyagok), több hatóanyag kombinációjában, „felütőanyagokkal” hígítva vagy hordozóra felvitt formában is (például a „herbál” vagy „varázsdohány” néven közismert, szintetikus kannabinoidokkal impregnált növényi anyagok).

Új vegyületek szerkezetazonosítása

Az újonnan megjelenő, korábban nem ismert vegyületek azonosítása klasszikus szerves kémiai szerkezetazonosítási probléma. A szerkezetazonosítás általában a tömegspektrometriás fragmentáció, az infravörös spektrumban található funkcióscsoportra jellemző sávok, a nagy felbontású tömegspektrometriás mérés alapján számított összegképlet, illetve a különböző NMR mérési technikák által szolgáltatott molekulaszervezeti információk alapján történik. Keverékek vagy hordozóra felvitt anya-



3. ábra. „Herbál” néven közismert, szintetikus hatóanyaggal impregnált növényi törmelék igazságügyi szakértői vizsgálatra küldött mintája

gok esetében első lépésként a szerkezetazonosításhoz szükséges mennyiségben izolálni kell a kérdéses hatóanyagot, amire jellemzően extrakciós vagy kromatográfiai módszerek alkalmazhatók.

A szerkezetazonosítás során nyert spektrumok a mérőműszerek által közvetlenül használható spektrum-könyvtárakba gyűjtve, a készülékek és a laboratóriumok között megoszthatók, így megfelelő alapot adnak a vegyület hatékony, rutinszerű azonosítására.

A rutin azonosítási módszerek kiválasztási szempontjai

Az alkalmazott módszerek kiválasztásánál – a célvegyületek és a lehetséges egyéb komponensek nagy száma és széles köre mellett – figyelembe kell venni a *feldolgozandó mintaszámot* is. A nagy mintaszámú területeken előnyösek a kevés emberi munkát igénylő, könnyen automatizálható, gyors, az egyszerű mintaelőkészítés és értékelés lehetőségét biztosító vizsgálati módszerek.

Az egyes kvalitatív analitikai vizsgálati módszerek *más-más azonosító/megkülönböztető képességgel rendelkeznek*. A kábítószerek és dizájner drogok vizsgálati területén külön szakmai ajánlás is elérhető arra vonatkozóan, hogy miként lehet figyelembe venni az egyes módszerek azonosító erejét és milyen elvek szerint célszerű meghatározni az alkalmazandó technikák minimális körét. [4]

A módszer technikai jellemzői mellett a dizájner drogok területén kiemelt fontosságú az elérhető információk köre. A napi

gyakorlat szempontjából azok a vizsgálati technikák alkalmazhatók hatékonyan, melyeknél – referenciaanyag hiányában – a vizsgálati eredmények digitálisan megoszthatók és referenciaadatként a különböző laboratóriumokban, különböző készüléktípusokon is felhasználhatók.

Gázkromatográfia-tömegspektrometria

Az analitikában általánosan használt, alapvető módszer a kromatográfiai elválasztást követő spektroszkópiai detektálás. A kábítószerek és dizájner drogok azonosítása esetén a lehetséges célkomponensek miatt a gázkromatográf-tömegspektrométer (GC-MS) műszeregyüttes terjedt el alap-

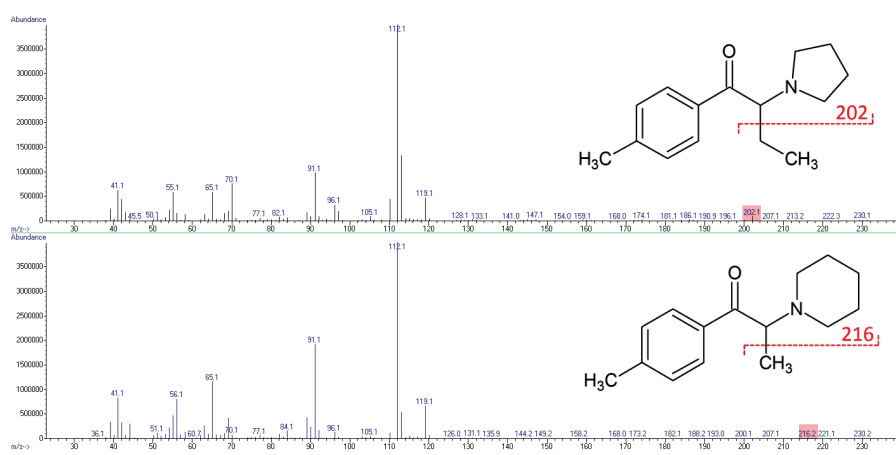
vető eszközként. A minta komponensei gázkromatográfian nagy hatékonysággal választhatók el, a módszer alkalmas a potenciális célvegyületek szinte teljes körének vizsgálatára, a retenció idő felhasználható az azonosítás során.

A módszer használata során azonban figyelemmel kell lenni arra, hogy magas hőmérsékleten egyes vegyületek átalakulást szenvedhetnek, a retenció az állófázis hosszú távú változása miatt változhat és ez az adat a különböző készülékek között csak bizonyos korlátok között vihető át még retenció indexrendszer alkalmazása esetén is.

A tömegspektrometriás detektálás ideális az ismeretlen anyagok áttekintő vizsgálatára, mivel a kiértékeléshez nagy számban állnak rendelkezésre spektrumkönyvtárak és az új anyagok spektrumai az egyes laboratóriumok között digitálisan könnyen megoszthatók. A tömegspektrum által hordozott molekulaszervezeti információ felhasználható az új anyagok szerkezetazonosításához is.

A tömegspektrum azonban nagyon hasonló lehet egyes szerkezeti izomerek esetében. A fenilcsoporton orto-, meta-, para-helyzetben szubsztituált izomerek tömegspektrumai között gyakran semmiféle különbség nem látható. Bizonyos esetekben csak kis intenzitású fragmensek jelenléte alapján azonosítható egyértelműen egy-egy adott szerkezeti izomer (4. ábra). Az izomerek azonosítása sok esetben a gázkromatográfiai retenció idő alapján is lehetséges, de ehhez minden kérdéses izomerből referenciaanyagnak kell(ene) rendelkezésre állnia. A fekete piacon az elmúlt 10–15 évben megjelent, közel 800 különféle vegyület összes releváns izomerét számba véve, ez tízezres nagyságrendű referencia-

4. ábra. Szerkezetre jellemző, de kis intenzitású fragmensek a szerkezeti izomerek tömegspektrumában az MPBP (felső spektrum) és az MDPPP (alsó spektrum) esetén



anyag-gyűjteményt feltételezne (nem is beszélve ilyen nagyszámú referenciaminta mérésének időigényéről)! Az erre specializálódott referenciaanyag-gyártóknál gyakran az alapvegyületek érhetőek csak el, de a termékpaletta-kerülés, majd a beszerzés időigénye miatt előfordulhat, hogy a referenciaanyag laboratóriumba érkezésekor az adott komponens már el is tűnik a feketepiaci forgalomból.

Rezgési spektroszkópiák (infravörös, Raman)

A nagy számban megjelenő, egymáshoz hasonló vegyületek szükségessé tették olyan komplementer technika általános bevezetését, amivel a GC-MS mérés során felmerülő izomerazonosítási problémák hatékonyan oldhatók meg. Erre a feladatra kiválóan alkalmasak a rezgési spektroszkópiás módszerek (infravörös és Raman-spektroszkópia), amelyek a különböző szimmetriájú és rezgési szerkezetű molekuláris esetében markánsan különböző eredményt szolgáltatnak.

Az infravörös spektroszkópia a Fourier-transzformációs analizátorok és a teljes csilapított reflexiós mérési technika (FTIR-ATR) széles körű terjedésének köszönhetően válhatott jól alkalmazható módszerrel a dizájn drogok vizsgálatában is. A mintaelőkészítést nem igénylő ATR-technika segítségével egy-két perc alatt néhány tízed milligramm porból vagy folyadékból is jó minőségű spektrum nyerhető. Ez nagyon hatékonyra teszi a tiszta anyagok, például a por formában előforduló katinonszármazékok vagy szintetikus kannabinoidek azonosítását. Több dizájn drog spektrumgyűjtemény is elérhető, a spektrumok digitális formában különböző készüléktípusok között is könnyen átvihetők, ami megkönnyíti az új anyagok azonosítását.

A katinonszármazékok jellemző hidroklorid sói mellett esetenként előfordulnak más savakkal képzett vagy vegyes sók is (például hidroklorid-hidrobromid), melyek infravörös spektruma eltérő. Ebben az esetben a mintát szabad bázisformára alakítva és illékony szerves oldószerben felvéve, majd az oldat egy cseppjét az ATR-feltétlen beszárítva nyerhetünk zavarásmentes spektrumot, ami már összevethető a bázisforma referenciaspektrumával. Hasonló eljárás használható a szerves oldószerben nem oldódó, nagyobb mennyiségben jelen lévő zavaró mátrixok esetében is, így hatékonyan vizsgálhatók infravörös spektroszkópiával egyes növényi törmelékre impregnált szintetikus kannabinoidek is.

A hosszabb szénláncot tartalmazó vegyületek esetében a szénlánc méretének növelésével egyre kevésbé változik a vegyület spektruma, így a homológok megkülönböztetésére az infravörös spektroszkópia csak korlátozottan alkalmas.

Elegyek esetében sokszor nem kerülhető meg a komponensek elválasztása az izomerek egyértelmű azonosításához. Az évtizedek óta rendelkezésre álló, gázkromatográffal kapcsolt gőzfázisú infravörös spektroszkópiás eljárás mellett már elérhető egy olyan technika is, ahol a gázkromatográfiás elválasztást követően a komponensek kondenzált fázisban detektálhatóak infravörös spektrumuk alapján. [6] Az új módszer kiválóan alkalmas elegyek vagy anyagmaradványok esetében is az izomerek egyértelmű azonosítására, akár közvetlenül a GC-MS vizsgálathoz használt mintaoldatokból. A gőzfázisú spektrumokkal ellentétben a kondenzált fázisban felvett spektrumok az esetek többségében hasonlóak az ATR-feltétlen készített spektrumokhoz, ami nagymértékben gyorsítja az azonosítást (5. ábra). A módszer számos előnye mellett hátránya az erőforrás- és időigényes üzemeltetés: a készülék detektorát és a mintakomponensek kondenzáltatására használt ZnSe-korongot cseppfolyós nitrogénnel kell hűteni, a kialakításból adódóan egy nap legfeljebb 8–10 minta vizsgálata lehetséges, az eredmények kiértékelése pedig jellemzően 10–30 perces folyamat.

A Raman-spektroszkópia alkalmazása leginkább a hordozható készülékekben, olyan helyszíni elővizsgálatok során terjedt el, mint például a vámmellenőrzés vagy a rendőri helyszínelés. [7] Előnye, hogy átlátszó

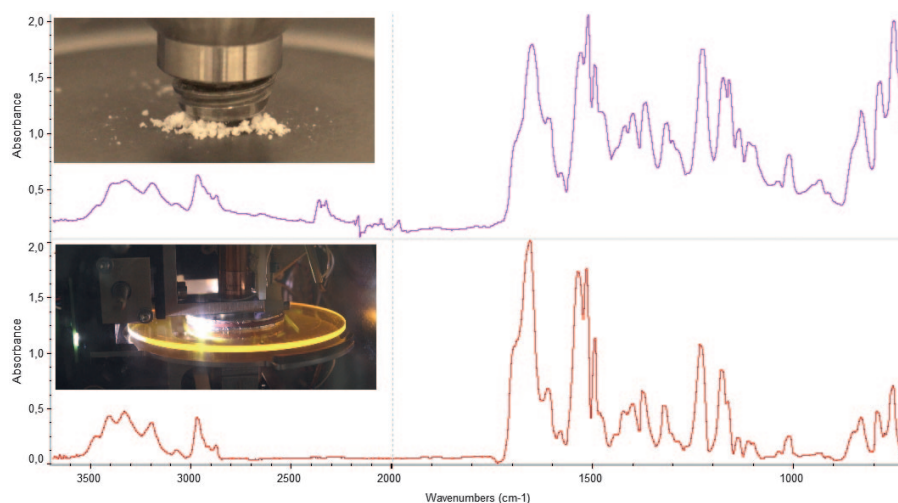
csomagolás esetén felbontás nélkül lehet az anyagokat vizsgálni, ami főként azokon a területeken fontos, ahol számítani lehet különösen potens fentanilszármazékok megjelenésére. Hátránya, hogy nem átlátszó csomagolás vagy színes anyagok esetén nem vagy csak korlátozottan alkalmazható, illetőleg különböző gyártók készülékei között a spektrumok átvitelére gyakorlatilag nincs lehetőség.

További azonosítási módszerek

A kábítószeres analitikájában használt folyadékkromatográfiás módszerek megfelelő detektálás mellett szintén segítséget nyújthatnak a vegyületek azonosításában. A gázkromatográfiához képest a folyadékkromatográfiás rendszerek az elválasztás szempontjából sokkal rugalmasabban „hangolható”, ugyanakkor egy-egy módszerrel jelentősen kisebb számú célvegyület választható el megfelelően. Tömegspektrometriás detektálás esetén a módszerek igen nagy érzékenységgel, segítségükkel a homológok jól megkülönböztethetők, ugyanakkor az azonos tömegspektrometriás választ adó szerkezeti izomerek azonosításához a kromatográfiás elválasztást kell megfelelően optimalizálni. Ez csak akkor oldható meg, ha a potenciális izomerek mindegyikéből rendelkezésre áll referenciaminta.

Az UV-spektroszkópiás detektálás egyes esetekben viszont nagy segítséget nyújthat az izomerek azonosításában. A diszubsztituált benzolgyűrűt tartalmazó vegyületeknél, a para-helyzetű csoportok esetén olyan szimmetrikus elektronrendszer alakul ki, ami jelentősen eltér az orto- és meta-izomerekétől, így elektrongerjesztési energiák is

5. ábra. Az ADB-FUBINACA szintetikus kannabinoidek kondenzált fázisú infravörös spektruma ATR-technikával (felső spektrum) és GC-IRD készülékkel (alsó spektrum) felvéve





különbözőek lesznek. A szubsztituált aromás ketonok esetében a para-izomerek UV-spektrumában az aromás vegyületekre jellemző intenzív elsődleges sáv (L_a) hullámhossza – a szubsztituenstől függően – jellemzően 10–60 nm eltérést mutat az orto- és meta-izomerekhez viszonyítva. Ebből adódóan a para-szubsztituált izomer UV-spektrum alapján már akkor is megerősíthető vagy kizárható, ha csak erre az izomerre vonatkozóan rendelkezünk referenciaspektrummal (6. ábra).

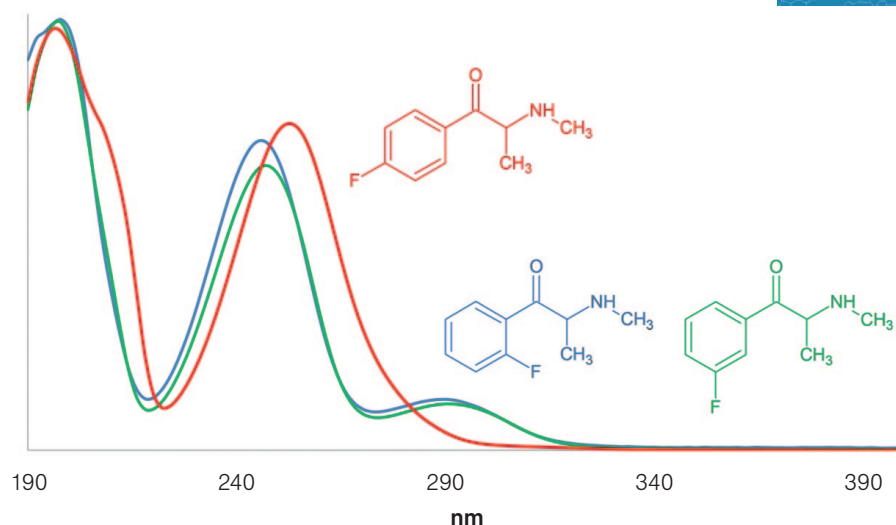
Az utóbbi években több gyártó jelent meg a piacon kedvező árfekvésű, *kis mágneses terű asztali NMR-készülékekkel* (60–80 MHz). Az úgynevezett „low-field NMR” készülékek segítségével felvett ^1H spektrumok az egyszerűbb molekulák esetén már elegendő információt hordoznak a vegyületek spektrumkönyvtári keresés alapján történő beazonosításához, tiszta anyagok esetében a mérés és kiértékelés időigénye néhány perc. [9]

Dizájner drogok kvantitatív analitikája

Kábítószeresek esetén a tiszta hatóanyag mennyiségének meghatározásához szükséges koncentrációt jellemzően kromatográfiai rutinmódszerekkel mérik. Kézenfekvő megoldás ezeknek a módszereknek az adaptálása a dizájner drogok kvantitatív vizsgálatára is. A kromatográfiai rendszerekben végzett méréseknel a kalibrációhoz a célvegyülettel azonos referenciaanyag alkalmazása szükséges.

Az újonnan piacra kerülő dizájner drogok esetén a kereskedelmi forgalomban először a kvalitatív vizsgálatok céljára előállított referenciaanyagok érhetők el. Ezek esetenként nem elhanyagolható mennyiségben tartalmaznak szennyezőket, bizonylatukon nem szerepel a pontos koncentráció és annak bizonytalansága. A kvantitatív mérésekhez alkalmas referenciaanyagok piacra kerülése esetén is jellemzően több hónapig tart a beszerzés az ellenőrzött anyagok importjához kötődő engedélyezési folyamatok miatt. Mivel az igazságügyi szakértői vélemény elkészítésére a jogszabály szerint maximum három hónap áll rendelkezésre, az új vegyületek esetén alternatív megoldások alkalmazása szükséges.

Az egyik kézenfekvő lehetőség az NMR-technika kvantitatív alkalmazása. [10] A megfelelő kísérleti körülmények között felvett ^1H -spektrumban a jel nagyság arányos a mintában lévő megfelelő protonok mennyiségével. A mérendő anyag ismert tömegű mintáját és a megfelelő referencia-



6. ábra. Fluorszubsztituált metkatinon-izomerek UV-spektrumának összehasonlítása: a para-izomer spektruma jelentősen eltér az orto- és meta-izomerek spektrumától

anyagot összemérve, a referenciaanyag és a mérendő anyag tömegeinek és jeleinek arányából a koncentráció kiszámítható. A vizsgálathoz olyan, a mért komponenstől eltérő szerkezetű referenciaanyag szükséges, aminek a jelei jól elkülönülnek a célvegyület jeleitől. Az alkalmazott oldószernek és a mérendő vegyületsopornak megfelelően kiválasztott referenciaanyag univerzálisan használható különböző vegyületek mérésére is. A megfelelő pontosságú mérés feltétele, hogy a célvegyületnek legyen legalább egy jól elkülönülő és egyértelműen integrálható protonjele, ami sem a mátrixkomponensek, sem a vegyület egyéb protonjeleivel nincs átfedésben. Ebből adódóan a módszer elsősorban a tiszta anyagok vagy egyszerű, nagyban eltérő molekulaszervezetű komponensekből álló elegyek esetén alkalmazható.

A másik lehetőség a szerkezetazonosításhoz izolált és tisztított anyagok referenciaanyagként való felhasználása a kvantitatív mérésekben. Ebben az esetben a tiszta anyag pontos koncentrációja (és annak bizonytalansága) a fent leírt NMR-módszerrel meghatározható. Szükséges emellett az anyag homogenitásának vizsgálata, valamint teljes karakterizálása is annak biztosítására, hogy az anyagminta nem tartalmaz a kvantitatív mérést befolyásoló egyéb komponenset. Az így megvizsgált anyagminta már alkalmas lehet a kromatográfiai módszerek kalibrációjára, melyek alkalmazásával rutinszerűen mérhető az összetettebb minták koncentrációja is.

Összefoglalás

Az elmúlt évtizedben széles körben megjelent dizájner drogok alapvetően „felfor-

gatták” a bűnügyi célú kábítószervizsgálatot végző laboratóriumok életét. A korábban jól meghatározott vegyületkör rutinvizsgálatát végző laboratóriumoknak fel kellett készülniük a szinte heti gyakorisággal megjelenő, korábban nem ismert, újabb és újabb vegyületek szerkezetazonosítására, illetve rutinszerű kvalitatív és kvantitatív analízisére. Az új anyagok esetében a hozzáférhető referenciaanyagok hiánya nemzetközi összefogásra és alternatív megoldások alkalmazására készítette a területen dolgozó szakembereket.

A nagyszámú, molekulaszervezetében egymáshoz hasonló vegyületek megjelenése szükségessé tette korábban csak esetenként alkalmazott analitikai módszerek beépítését a rutinvizsgálati stratégiába. A széles körű analitikai eszköztár használata komoly felkészültséget, a vegyületek sokfélesége pedig átfogó, kritikus analitikai szemléletet követel meg ezen az izgalmas és változatos szakterületen a kémikusoktól.

IRODALOM

- [1] Rompos É., in: Doktori műhelytanulmányok 2017 Győr, Széchenyi István Egyetem Állam- és Jogtudományi Doktori Iskola, 2017.
- [2] Ujváry I., Magy. Kém. Lapja (2013) 68, 70.
- [3] Ujváry I., Magy. Kém. Lapja (2013) 68, 112.
- [4] Scientific Working Group for the Analysis of Seized Drugs (SWGDRUG) Recommendations, Part III.B, <http://swgdrug.org/approved.htm>
- [5] A. Urbas et al., Forensic Chemistry (2018) 9, 76.
- [6] Hui Zhi Shirley Lee et al., Forensic Sci. Int. (2019) 299, 21.
- [7] J. Omar, et al., Journal of Raman Spectroscopy (2018) 50, 41.
- [8] A. I. Scott, Pergamon Press (1964) 109.
- [9] L. H. Antonides et al., ACS Omega (2019) 4, 7103.
- [10] T. Schoenberger, Guideline For qNMR Analysis, <http://enfsi.eu/documents/forensic-guidelines/>